有机层厚度变化的有机电致发光器件与微腔器件光谱分析

张春玉^{1,2},王 成³,肖力光¹,陆景彬²,王洪杰¹,孔令炜¹

1. 吉林建筑工程学院材料科学与工程学院, 吉林 长春 130118

2. 吉林大学物理学院, 吉林 长春 130021

3. 中国科学院长春光学精密机械与物理研究所, 吉林 长春 130033

摘 要 设计中心波长为 520 nm,改变有机层厚度,即空穴传输层 NPB 和发光层 Alq₃ 的厚度,分别由 10 nm 逐渐增加至 100 nm,器件的总体厚度也随着改变,分别计算模拟出有机电致发光器件(OLED)和微腔有 机电致发光器件(MOLED)的电致发光谱(EL),并对光谱的积分强度、峰值强度、半峰全宽、峰值位置的三 维分布图进行比较分析。综合考虑光谱的峰值位置(中心波长)、最大的峰值强度和积分强度(与亮度、效率 相关)、最小半峰全宽(色纯度高)进行合理的设计,可以找到最佳厚度。发现: NPB 和 Alq₃ 的厚度分别为 70 和 62 nm 时,器件性能最佳,并且微腔器件的结果尤为明显。结果表明,通过模拟计算,可以深入探索 MOLED 和 OLED 发光特性,设计出合理的器件结构。

关键词 有机电致发光器件;光学微腔;厚度;模拟计算 中图分类号:TN383.1;O482.3 文献标识码:A DOI:10.3

引 言

有机电致发光器件(OLED)是近年来发展非常迅速的一 种新型显示技术^[1-5]。由于尺寸在光波长量级的光学微腔对 腔内材料自发发射特性有很强的修饰作用,因此如何利用微 腔来增强 OLED 的电致发光性能,也成为该领域的一个研究 热点^[6-8]。

对于有机电致发光器件(OLED)和微腔有机电致发光器 件(MOLED)的实验研究很多^[9-11],但是对其理论和器件的 结构设计研究较少,尤其是 MOLED。微腔有机电致发光器 件的发光特性直接与微腔的结构相关,因此,要制作出高效 率的微腔有机电致发光器件(MOLED),深入开展理论研究, 进行器件的结构合理化及优化设计十分必要。作者曾在此方 面做过一些研究工作,得到了一些成果^[12-14]。目前还在进一 步的研究中。

在这里,从微腔的原理出发,根据 MOLED 的计算公式 运用传输矩阵法对微腔器件进行模拟计算,通过改变微腔内 各有机层厚度,以及器件的总体厚度也随着改变来比较 MOLED 的电致发光(EL)谱的各项发光性能。而 OLED 也可 以看成是一个弱的微腔器件,用同样的微腔计算公式来模拟 计算。最后做逐一比较,进而找到合理的有机层厚度组合。 DOI: 10. 3964/j. issn. 1000-0593(2012)01-0069-05

1 相关计算公式

微腔的谐振模式满足 Fabry-Perot 方程^[15]

$$(\varphi_1 + \varphi_2) + \frac{4\pi}{\lambda} \sum_i n_i d_i \cos\left[\arcsin\left(\frac{\sin\theta}{n_i}\right)\right] = 2m\pi \quad (1)$$

式中 φ_1 和 φ_2 分别为分布式布拉格反射镜(DBR)和金属镜的 反射相移, λ 是谐振波长, n_i 和 d_i 分别为腔内各层薄膜的折 射率和厚度, θ 是外部探测角, m 是模式级数。

理论上垂直表面的有机微腔的发光谱可以通过下面的方 程计算得到^[16]

$$|E_{c}(\lambda)|^{2} =$$

$$\frac{(1-R_{\rm d})\left[1+R_{\rm m}+2~\sqrt{R_{\rm m}}\cos\left(\frac{4\pi x}{\lambda}\right)\right]}{1+R_{\rm m}R_{\rm d}-2~\sqrt{R_{\rm m}R_{\rm d}}\cos\left(\frac{4\pi L}{\lambda}\right)} \mid E_{\rm m}(\lambda)\mid^2 (2)$$

式中 R_d 和 R_m 分别是 DBR 和金属的反射率, x 为激子与金属电极间的有效光学距离, L 为有效腔长, $|E_n(\lambda)|^2$ 为发光 材料在自由空间的光谱分布。

分别改变有机层的厚度,进行模拟计算并比较 MOLED 和 OLED 各项性能。

(1) MOLED 结构: Glass/DBR/ITO(65 nm)/NPB(10~
 100 nm)/Alq₃ (10~100 nm)/Al(150 nm)。DBR 结构: 3

基金项目:国家自然科学基金项目(11075064,60376029)资助

作者简介:张春玉,女,1968年生,吉林建筑工程学院材料科学与工程学院副教授

e-mail: zhangccy68@163.com

收稿日期: 2011-02-19,修订日期: 2011-06-28

(*HL*), *H*为 Ta₂O₅, 其折射率为 2.05; *L*为 SiO₂, 其折射率 为 1.46; ITO 折射率为 2.0, 中心波长为 520 nm。

(2) OLED 结构: Glass/ITO(65 nm)/NPB(10~100 nm)/Alq₃(10~100 nm)/Al(150 nm)。此时把 ITO 作为一个 弱反射镜, ITO 折射率为 2 0, 中心波长为 520 nm。这样可 以把 OLED 看作弱的微腔效应的 MOLED。

两个器件都是用铝作金属镜同时做阴极。ITO 作阳极。 有机层的空穴传输层 NPB 和发光层 Alq₃ 的厚度都在变化, 分别由 10 nm 逐渐增加至 100 nm, 微腔的总长度也随着改 变, 观察模拟计算的三维 EL 谱发光性能的变化趋势并进行 比较。

2 模拟与结果分析

2.1 计算的 MOLED 和 OLED 的 EL 谱的积分强度变化趋势分布

图 1 是模拟计算的随 NPB 和 Alq₃ 的厚度变化 MOLED 的 EL 谱的积分强度变化的三维分布图。



different thickness for NPB and Alq₃

图 1 中,横坐标是 NPB 的厚度,纵坐标是 Alq₃ 的厚度 变化,用颜色来反映对应的 NPB 和 Alq₃ 的相应厚度处的 EL 光谱积分强度的大小,数值由黑、蓝、浅蓝、绿到红逐渐 变大,红色表示的数值最大。图中可见积分强度的分布比较 均匀,呈现环形,由外到里强度逐渐变大,中心处小的不规 则红色区域,即 NPB 的厚度在 70~80 nm, Alq₃ 的厚度在 60~65 nm 之间的区域,积分强度最大,是得到器件效率最 好的区域,制作器件时,有机层的厚度要以此参考,才可以 制作出最好的器件。

图 2 是随 NPB 和 Alq₃ 的厚度变化 OLED 的 EL 谱的积 分强度变化的三维分布图,也是按颜色分区。普通的 OLED 相当于一个弱的微腔器件,有弱的腔效应,计算结果也正说 明了这一点。模拟计算的器件的 EL 谱积分强度与微腔器件 的变化大致相同,也是呈现环状的分区,由外到内,强度逐 渐变大,只是变化幅度要小的多,即弱的腔效应。这说明, 若不考虑制作器件的其他因素,只是考虑有机层的厚度对器 件效率的影响时,有最佳的厚度组合,对于前面结构的 OLED 来讲, NPB 的厚度和 Alq₃ 的厚度应该在位于中心的





Fig 2 Integrated intensity of the EL spectra of OLEDs with different thickness of NPB and Alq₃

2.2 计算的 MOLED 和 OLED 的 EL 谱的峰值强度变化趋势分布

图 3 是模拟计算的随 NPB 和 Alq₃ 的厚度变化 MOLED 的 EL 谱的峰值强度变化的三维分布图,从图中可以看到, 有三个岛状分布的区域,峰值强度是呈环状阶梯变化,外边 缘处深蓝色部分代表强度低,最中间一小块红颜色区域(大 约是 NPB 的厚度在 60~75 nm, Alq₃ 的厚度在 55~65 nm 之间的区域)是峰值强度最大的区域。图的下左部位有两个 小岛,峰值强度相对其附近的区域要大,也是由外到里逐渐 变大,这是微腔效应导致的,此小区域的腔长是微腔的谐振 波长。



Fig 3 Intensity of the EL spectral peak of MOLEDs with different thickness of NPB and Alq₃

在与之相比较的图 4 是随 NPB 和 Alq₃ 的厚度变化 OLED 的 EL 谱的峰值强度变化的分布图中,只看到一个环 状分布的区域,并且变化的幅度要远小于 MOLED 的变化。 峰值强度变化也呈环状阶梯变化,最中间一小块红颜色区域 (大约是 NPB 的厚度在 55~80 nm, Alq₃ 的厚度在 50~75 nm 之间的区域)是峰值强度最大的区域。说明对于 OLED 的 峰值强度来讲,在此区域的有机层厚度组合的器件是最好 的。

所以,如要得到发光峰值强度最大,制作器件要选择计 算的位于中心的红色区域内相应的有机层的厚度组合。



Fig 4 Intensity of the EL spectral peak of OLEDs with different thickness of NPB and Alq₃

2.3 计算的 MOLED 和 OLED 的 EL 谱的峰值位置变化趋势分布

图 5 是模拟计算的随 NPB 和 Alq₃ 的厚度变化 MOLED 的 EL 谱峰值位置变化的分布图,图中的峰值位置变化总体 规律是随着总腔长(NPB+Alq₃ 的厚度)的增加,器件的峰值 位置红移,由 457 nm(NPB=10 nm, Alq₃=70 nm; NPB= 70 nm, Alq₃ = 10 nm)蓝光区域移动到 611 nm 红光区域 (NPB=85~100 nm, Alq₃=100~85 nm)。当然在有机层厚 度很薄时,NPB 和 Alq₃ 的厚度都小于 45 nm 以内时,峰值 位置的变化又与图中右上方变化规律不同,不过还是对称分 布的形状,究其原因,是总的微腔长度改变了,引起谐振峰 值的变化,显示出了强的微腔效应。



Fig. 5 Peak of the EL spectra of MOLEDs with different thickness of NPB and Alq₃

与之比较的无腔器件 OLED 随 NPB 和 Alq₃ 厚度变化的 EL 谱的峰值位置变化的分布图表示在图 6 中,变化幅度明 显小,峰值位置最小 500 nm 绿光区域,最大 551 nm 绿光区 域,变化的规律性与 MOLED 比较也不强,说明了腔效应虽 不明显,也有较弱的现象,因为总厚度变化,峰值位置也随 之变化。

值得注意的一点, MOLED 的 EL 谱的峰值位置随着总体厚度增加,由 457 nm 蓝光~520 nm 绿光~611 nm 红光,只一种发光材料,用微腔结构就可以分别得到三种颜色光,

体现强的微腔效应。而 OLED 峰值只是 500~551 nm 都在绿 光区域。



Fig 6 Peak of the EL spectra of OLEDs with different thickness of NPB and Alq₃

 2.4 计算的 MOLED 和 OLED 的 EL 谱的半峰全宽 (FWHM)变化趋势分布

比较模拟计算的 EL 谱的半峰全宽变化规律,对于 MOLED 来说,由图 7 看到,随 NPB 和 Alq₃ 的厚度变化 MOLED 的 EL 谱的半峰全宽变化很有规律,右上方大块的 蓝色区域(NPB=73~100 nm, Alq₃ = 80~100 nm)对应 EL 谱的半峰全宽小于 19 nm。在 NPB 和 Alq₃ 的厚度分别在 45 nm 的上、下两部分的规律不同,厚度大于 45 nm 时,随着 NPB 和 Alq₃ 的厚度增加,MOLED 的 EL 谱的半峰全宽逐渐 变小,最终小至 9 nm。而 NPB 和 Alq₃ 的厚度小于 45 nm 时,也即图中左下角部分,却是随有机层厚度变小而变小。 还看到,MOLED 的 EL 谱的半峰全宽的变化范围比较大, 在 9 nm(当 NPB=50 nm, Alq₃ = 30 nm 时)和 223 nm(NPB =10 nm, Alq₅ = 60 nm)之间。这也归结到微腔效应,一定厚 度的器件,都有谱线窄化现象。



图 8 是计算的随 NPB 和 Alq₃ 厚度变化 OLED 的 EL 谱 的半峰全宽变化的分布图,也有半峰全宽变小现象,即弱的 腔效应,但是幅度与 MOLED 相比较是非常小的,OLED 的 半峰全宽最大123 nm(NPB=100 nm,Alq₃=100 nm)最小



71 nm(NPB=90 nm, Alq₃=30 nm)。图的右上角, 半峰全宽 变化随厚度变化而变化的层次比较明显, 随有机层厚度的增 加而加大, 这一点与 MOLED 不同。并且 OLED 半峰全宽的 大块区域在图的中间, 数值在 75 nm 左右。

3 结 论

综合以上光谱模拟结果,在制作 MOLED 和 OLED 器件 时,对于有机层的相对厚度和总体厚度都要考虑。设计的中 心波长为 520 nm 时,NPB 和 Alq₃ 的厚度分别为 70 和 62 nm 时,器件性能最佳,并且微腔器件的结果尤为明显。

所以说,制作器件前要综合考虑光谱的峰值位置(需要的波长,颜色)、最大的峰值强度和积分强度(亮度、效率)、 最小半峰全宽(色纯度)进行合理的设计,可以找到最佳厚度,得到所希望的高效合理的器件结构。

References

- [1] Tang C W, Van Slyke S A. Appl. Phys. Lett, 1987, 51(12): 913.
- [2] Shizuo Tokito, Toshimitsu Tsuzuki, Fumio Sato, et al. Current Applied Physics, 2005, 5: 331.
- [3] Heinz Baèssler. Injection, Polym. Adv. Technol., 1998, 9: 402.
- [4] Baldo M A, Thompson M E, Forrest S R. Nature, 2000, 403: 750.
- [5] NIU Lian-bin, GUAN Yun-xia(牛连斌, 关云霞). Acta Physica Sinica(物理学报), 2009, 58(7): 4931.
- [6] Shizuo Tokito, Tetsuo Tsutsui, Yasunori Taga. Journal of Applied Physics, 1999, 86(5): 2407.
- [7] XIONG Zu-hong, SHI Hua-zhong, FAN Yong-liang(熊祖洪,史华忠,樊永良). Acta Physica Sinica(物理学报), 2003, 52(5): 1222.
- [8] CAO Jin, JIANG Xue-yin, ZHANG Zhi-lin(曹 进,蒋雪茵,张志林). Acta Physica Sinica(物理学报), 2007, 56(6): 1088.
- [9] Jordan R H, Rothberg L J, Dodabalapur A, et al. Appl. Phys. Lett., 1996, 69(14): 1997.
- [10] SUN Xiao-yan, LI Wen-lian, HONG Zi-ruo, et al(孙小燕,李文连,洪自若,等). Chinese Journal of Luminescence(发光学报), 2005, 26(2), 262.
- [11] ZHANG Chun-yu, XIAO Li-guang, LU Jing-bin, et al(张春玉,肖力光,陆景彬,等). Acta Optica Sinica(光学学报), 2010, 30(6):
 1788.
- [12] ZHANG Chun-yu, LU Jing-bin, GUO Shu-xu, et al(张春玉,陆景彬,郭树旭,等). Chinese Journal of Luminescence(发光学报), 2010, 31(4): 493.
- [13] WANG Hong-jie, ZHANG Chun-yu(王洪杰,张春玉). Chinese Journal of Luminescence(发光学报), 2010, 31(2): 167.
- [14] ZHANG Chun-yu, LU Jing-bin, WANG Cheng, et al(张春玉,陆景彬,王 成,等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱 分析), 2011, 31(1): 47.
- [15] Boo Young Jung, Nam Young Kim, Changhee Lee. Appl. Opt., 2002, 41(16): 3312.
- [16] Deppe D C, Lel C, Lin C C, et al. Journal of Modern Optics, 1994, 41(2): 325.

Spectral Analysis of Organic/Microcavity Organic Light-Emitting Devices with the Change in Thickness of Organic Layer

ZHANG Chun-yu1-2, WANG Cheng3, XIAO Li-guang1, LU Jing-bin2, WANG Hong-jie1, KONG Ling-wei1

1. School of Materials Science and Engineering, Jilin Architectural and Civil Engineering Institute, Changchun 130118, China

- 2. College of Physics, Jilin University, Changchun 130021, China
- 3. Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun 130033, China

Abstract Organic light-emitting devices (OLEDs) with emission peak at 520 nm were designed. The electroluminescence (EL) spectra including the integrated intensity, the peak width at half height, and the intensity and the position of the peak of the EL spectra of the OLEDs and microcavity OLEDs (MOLEDs), the total thickness of organic layers which is changeable, were calcu-

lated and theoretically analyzed with the thickness of the layer of NPB and light-emitting layer of Alq_3 ranging from 10 to 100 nm, respectively. According to these studies, it was found that the optimized OLEDs should be constructed with 70 nm NPB and 62 nm Alq_3 , and this structure should be more suitable to configurate the MOLEDs. These results suggest that the suitable structure of OLEDs/MOLEDs could be designed with help of theoretical calculation, which is also helpful to the light-emitting properties of OLEDs and MOLEDs.

Keywords Organic light-emitting devices; Optical microcavity; Thickness; Theoretical calculation

(Received Feb. 19, 2011; accepted Jun. 28, 2011)

ICASI'2012, CCATM'2012 国际冶金及材料分析测试学术报告会及展览会 征文通知

为促进全球范围内冶金及材料分析测试技术、优化冶金制造流程与产品的过程检测,国际钢铁工业分析委员会、中国金属学会(CSM)及中国机械工程学会(CMES)将于 2012年 10月 31日 - 11月 3日在"国家会议中心(北京)"联合举 办 ICASI/2012, CCATM/2012国际冶金及材料分析测试学术报告会及展览会。热忱欢迎冶金、材料、矿山、化工、机械、地质、环保、外贸、国防、商检等单位、部门或院校从事冶金分析、无损检测、物理及力学测试等相关工作的技术人员及管理者 踊跃投稿,积极参加。

时间/地点

2012 年 10 月 31 日—11 月 3 日,北京・国家会议中心

征稿范围

征稿范围将涵盖与材料及冶金分析测试相关的综述、研究报告、技术应用报告以及实践工作交流等。包括(不局限于)试 样前处理及湿法分析、等离子体光谱、等离子体质谱、原子吸收光谱、原子荧光光谱、火花光谱、激光光谱、辉光光谱/辉光质 谱、X-射线荧光光谱、色谱分析、状态分析、材料气体分析、原位统计分布分析、冶金过程在线及环境分析、材料微观解析、 失效分析及动态断裂、力学测试、物性分析、无损检测、参考物质/不确定度、实验室能力验证、纳米材料性能检测、实验室管 理与质量控制等。

论文提交

论文提交请登陆《冶金分析》期刊网站: http://journal.yejinfenxi.cn。论文提交期 限为 2012 年 4 月 30 日,注意表明稿件 类型为"2012 年会论文"。

联系方式

ICASI' 2012, CCATM'2012 大会组委会

《冶金分析》编辑部

地址:北京海淀区学院南路 76 号 14 信箱,邮编: 100081

电话: 010-62182398; 010-62188330 传真: 010-62181163

E-mail: yifx@analysis.org.cn; yejinfenxi@ncschina.com

年会网址

www.icasi-csm.org